

Ising 模型重整化 (1)

陶如意

April 2023

摘要

本文以 Ising 模型为例,介绍了重整化理论分别在静态物理模型和动力学模型中的应用,指出重整化理论不仅是一种可以用于求解相变点的方法,还能够推导出临界指数之间依赖关系,而这是传统解析形式无法做到的。本文主体分为静态模型和动力学模型两个部分,并在文章的最后给出神经网络和重整化理论结合的前沿进展文献调研。

1 Ising Model

Ising 模型是统计物理学中的一个经典的简化模型,用于描述铁磁体在磁场中的磁化行为。它由格点上的自旋组成,自旋相互作用产生相互作用能。此模型在磁性、相变、临界现象等研究中具有重要意义。常见的 Ising 模型仅考虑近邻相互作用,哈密顿量如下所示

$$H(s_i) = - \sum J_{ij} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (1)$$

其中 J_{ij} 是相互作用耦合系数,第二项表示外场 h 对系统产生的作用,当系统处于平衡态时,系统构型 S 的分布满足玻尔兹曼分布

$$p(S) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H(s_i)) \quad (2)$$

其中 $\beta = 1/k_B T$, Z 是归一化因子,我们称为配分函数

$$Z = \sum_j \exp(-\beta H(s_j))$$

Ising 模型可以描述铁磁相变。对于相变行为来说,一个关键的指标就是临界指数,它描述的是宏观物理变量在系统在临界点附近幂律变化速度。比如系统的磁化强度会随着温度的升高在临界点之后降为 0,系统表现出无磁性。而磁化强度的临界指数即可描述磁化强度随着温度衰减的“速率”。在二维最近邻 Ising 模型中,磁化强度临界指数 $\beta = 1/8$ 。Ising 模型还有几个重要的物理量,如比热,磁化率,关联长度等(公式3,共 6 个)。图1展示了详细的临界指数理论值。

$$\begin{aligned} m &\sim (T - T_c)^\beta \\ \chi &\sim (T - T_c)^{-\gamma} \\ C &\sim (T - T_c)^{-\alpha} \\ \xi &\sim (T - T_c)^{-\nu} \\ M &\sim H^{1/\delta} \\ G(r) &\sim r^{-d+2-\eta} e^{-r/\xi} \end{aligned} \quad (3)$$

我们现在已经知道,由于临界态附近系统涨落非常大,平均场理论得出的临界指数解是不准确的。但值得一提的是,无论是平均场理论,还是二维的解析解,或者是三维的近似解,这些计算得到的临界指数

表 6.1 临界指数的理论值

指 数	平均场	二维伊辛模型	三维伊辛 (级数解, 2002)
α	0 (跃变)	0 (对数)	0.1096 (5)
β	1/2	1/8	0.32653 (10)
γ	1	7/4	1.2373 (2)
δ	3	15	4.7893 (8)
ν	1/2	1	0.63012 (16)
η	0	1/4	0.03639 (15)

图 1: Ising model 临界指数。图来源 [?]

之间都存在着一些等式关系 (公式4)。人们发现其实这 6 个临界指数只有 2 个自由度, 只要知道其中 2 个就可以推出另外的临界指数。这一点无论是平均场理论, 还是在二维时的解析解推导, 都是无法解释的。直到人们引入了标度假定, 才明白其这背后意味着什么。在这里我们主要介绍重整化理论。虽然我们没有对标度假定展开论述, 但我们要知道的是, 标度假定的提出在前, 而重整化理论为标度假定提供了证据, 使得我们得以用一种全新的方式看待这类发生相变现象的系统。

$$\begin{aligned}\alpha + 2\beta + \gamma &= 2 \\ \alpha + \beta(\delta + 1) &= 2\end{aligned}\tag{4}$$

2 Renormalization Ising Model in Real-Space

重整化方法描述的, 实际上是逐渐降低系统分辨率, 但不失去系统宏观行为的过程。将局部的粒子看成是一个整体区块, 忽略区块内部微观结构, 将系统行为看成是区块之间的相互作用。一个考虑 n 个近邻相互作用的 Ising 模型如下

$$H(\mathbf{K}, S) = K_0 + K_1 \sum_i s_i + K_2 \left(\sum_{ij} \right)^{(1)} s_i s_j + K_3 \left(\sum_{ij} \right)^{(2)} s_i s_j + \dots\tag{5}$$

其中 $(\sum)^{(n)}$ 是指仅包含第 n 个近邻相互作用。我们常见到的 Ising 模型, $K_1 = h$, $K_2 = \beta J$, 其他系数 \mathbf{K} 都为 0。我们可以合理地假设, 在重整化过程中, 公式5的形式是不变的, 相当于要处理的对象仅从单个粒子变成了一个区块。根据刚刚的描述, 我们可以假设经过一个尺度 b 的重整化操作后 ($a < b \ll \xi$), 区块之间的相互作用依然满足公式5, 不过系数 \mathbf{K} 变成了 \mathbf{K}' 。

$$H_b(\mathbf{K}', S_b) = K'_0 + K'_1 \sum_i S_i + K'_2 \left(\sum_{ij} \right)^{(1)} S_i S_j + \dots\tag{6}$$

注意, 公式5和6是同一个, 只不过将其中的 s_i 捏成了 S_i , 即 S_i 是几个 s_i 粗粒化后形成的大 cell。而 \mathbf{K}' 是为了让公式6有和公式5相同的形式“凑”出来的。这样我们就可以得到参数 \mathbf{K} 的变换函数。而这个变换函数我们就称为重整化函数。

$$\mathbf{K}_b = R(\mathbf{K})\tag{7}$$

以上是实空间重整化的通用表述, 接下去我们就详细来看以 Ising 为例如何进行重整化相关的推导

2.1 1d Ising model renormalization

1d Ising 模型通常是以链式结构存在。我们假设此处的粗粒化策略为, 将 2 个自旋合为一个大的自旋 S_I , 并仅保留奇数位置的自旋 (如图2)。

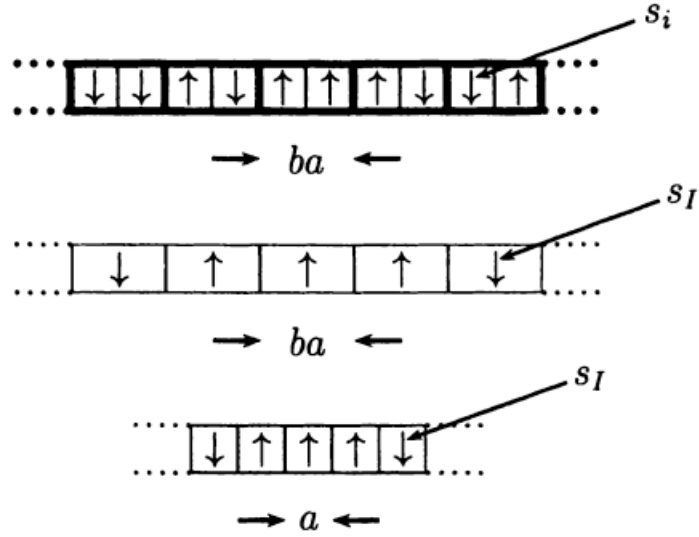


图 2: 1 维 Ising 重整化, 图来源 [?]

section3有详尽的推导过程, 这里我们为了逻辑的连贯性直接给出结论: 仅考虑原始系统为最近邻相互作用的 ising 模型时, 1 维的 Ising 模型重整化函数为公式8。

$$\begin{aligned} K'_0 &= \ln(2\sqrt{\cosh 2K_1}) \\ K'_1 &= \frac{1}{2}\ln(\cosh 2K_1) \end{aligned} \quad (8)$$

我们会发现 K 的变化也是一个动力系统。这里我们只关注 K_1 的变化 (因为 K_0 和温度无关), 图2.1展示了 K_1 的变化。从中可以很清楚地看出, 1 维 Ising 模型在参数空间中两个不动点 ($K_1^* = 0$ 和 $K_1^* = \infty$), 其中 $K_1^* = 0$ 是稳定的不动点。这意味着在重整化的过程中, 系统会向着 $K_1^* = 0$ 的状态变化, 而这一状态就是 $T=0$ 的低温状态。这和我们对于 1 维 Ising 进行解析求解时得到的结论是一致的, 1 维情况下不存在奇异点。

2.2 2d Ising model renormalization

对于 2 维的 ising 模型, 我们这里假设采用的重整化策略是忽略图2.2(a) 中的灰色点。最终得到图2.2 (b)。

同样, 详细的推导过程放在 section3中。我们最终可以得到 2 维 Ising 模型重整化函数如下

$$\begin{aligned} K'_0 &= \ln(2\sqrt{\cosh 2K_1}(\cosh 4K_1)^{1/8}) \\ K'_1 &= \frac{1}{4}\ln(\cosh 4K_1) \\ K'_2 &= \frac{1}{8}\ln(\cosh 4K_1) \end{aligned} \quad (9)$$

公式8和9就是重整化方程, 我们可以写成通用的形式 $R(\mathbf{K})$ (公式10)

$$R(\mathbf{K}) = \mathbf{K}' \quad (10)$$

在公式9中之所以要引入 K'_2 (也就是重整化后的模型需要引入次近邻相互作用), 是因为如果不引入的话, 我们会发现最后求解相变的结果是不正确的, 也就意味着我们在粗粒化过程中过度丢掉了一些信息。而加入 K'_2 这一项后就能和解析解吻合。当然我们也可以考虑加入更多的耦合项 K'_3, K'_4 等, 但出于精度考虑的话并无太多的必要, 反而增加了问题的复杂度。

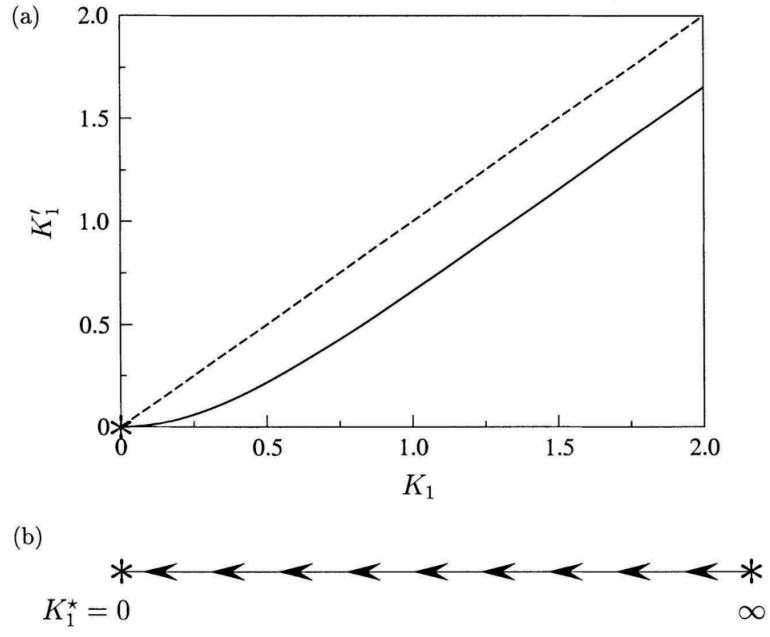


图 3: 1 维 Ising 模型在重整化过程中参数 K_1 的变化。图来源 [?]

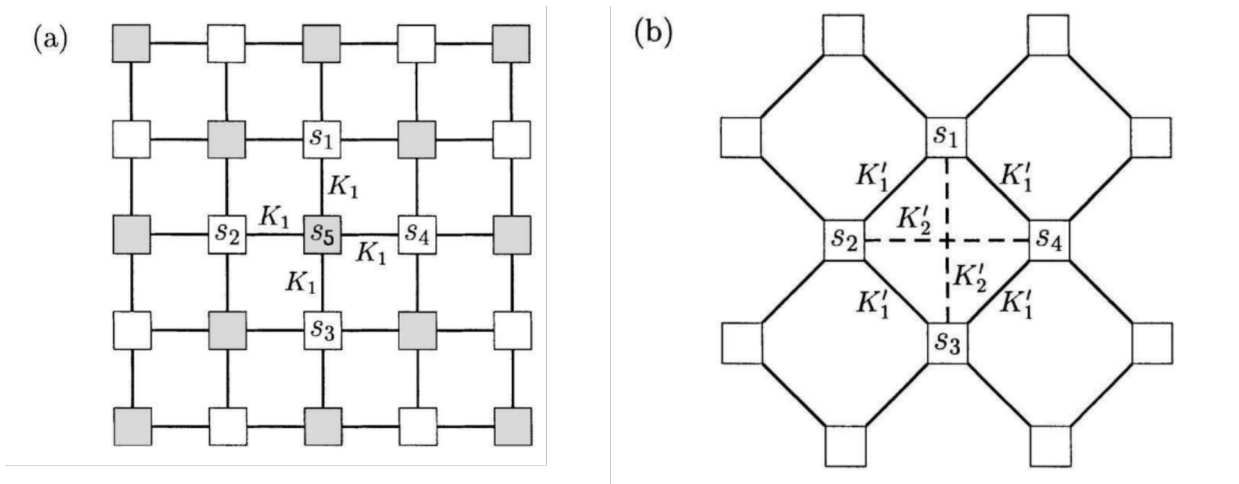


图 4: 2D Ising 模型重整化示意

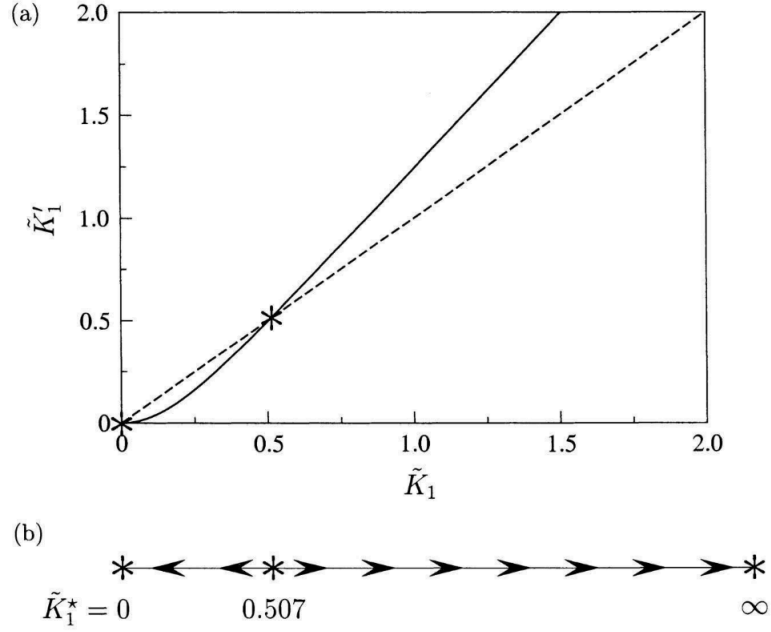


图 5: 2D 情况下 \tilde{K}_1 随着重整化的变化

我们可以将 K'_1 和 K'_2 的效应合并为 \tilde{K}'_1 , 即

$$\tilde{K}'_1 = K_1 + K_2 = \frac{3}{8} \ln(\cosh 4\tilde{K}_1)$$

那同样的, 我们可以画出此时参数随着重整化的变化, 图2.2所示。可以看到, 此时参数空间除了 0 和 ∞ 之外, 还存在着一个不稳定的, 非平凡的不动点 $K^* = 0.507$ 。当 $K = K^*$ 时, 系统参数不会随着重整化发生改变。而这其实就是 2 维 Ising 系统的相变点。

我们可以从关联长度的角度再理解一下参数的变化和系统有序状态的关系。我们知道对系统的重整化可以通过对系统状态进行粗化的形式进行, 这一操作一个很直观的物理图像是, 所有和长度相关的变量都会在重整化过程中被直接影响, 比如系统的尺寸, 系统的关联长度等。其中关联长度是系统一个非常关键的属性, 刻画了系统内相互作用可以“传播”的特征长度。而每次重整化也都会对关联长度产生直接的影响。如我们每次都以尺度 b 对系统进行缩放, 那么关联长度每次都会发生如下变化:

$$\xi_b = \frac{\xi}{b}$$

如果关联函数是有限的, 那么每次重整化操作后, 变换后的系统关联长度就会“收缩”。图2.2展示了对于 2 维的 ising 模型关联长度的变化。在临界点处, 关联长度发散, 系统远离临界点后关联长度会逐渐衰减, 最终降到 0。所以, 重整化操作会让关联长度“收缩”, 也就等价于系统温度发生变化, 高温时重整化等价于让温度变得更高, 低温时等价于让温度变得更低。

而在临界点处, 关联长度趋于无穷, 此时长度的变换不会改变系统的性质 (scale invariant at T_c), 所以重整化也就不会对系统温度产生影响, 也就是说, 这描述的也是重整化过程中参数空间中的不动点。所以, 重整化流中的参数不动点, 等价于系统的临界点。我们可以用这种方式求解出临界点的位置 \mathbf{K}^*

$$\mathbf{K}^* = R(\mathbf{K}^*) \quad (11)$$

那么如何用该理论计算临界指数呢?

我们假设 $\mathbf{K} = \mathbf{K}^* + \delta\mathbf{K}$, 即当前系统处于近临界态, 对重整化函数在 \mathbf{K}^* 处展开

$$R_b(\mathbf{K}) = R_b(\mathbf{K}^*) + \mathbf{M}(b)\delta\mathbf{K} + O(\delta\mathbf{K}^2) \quad (12)$$

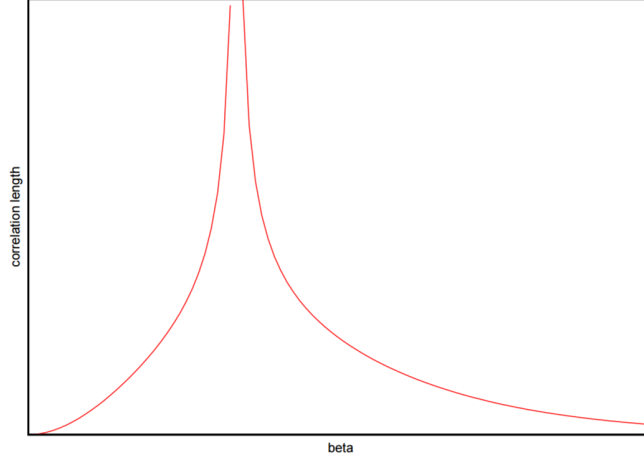


Figure 1: Qualitative behavior of the correlation length as a function of inverse temperature

图 6: 关联长度和 β (温度的倒数) 之间的函数关系

其中 $M(b) = \partial \mathbf{K}' / \partial \mathbf{K}_{\mathbf{K}=\mathbf{K}^*}$ 。而我们可以合理地假设

$$R_b(\mathbf{K}) = \mathbf{K}^* + \delta \mathbf{K}' \quad (13)$$

$$R_b(\mathbf{K}^*) = \mathbf{K}^*$$

所以

$$\delta \mathbf{K}' = \mathbf{M}(b) \delta \mathbf{K} \quad (14)$$

$\mathbf{M}(b)$ 描述了重整化流朝着/远离不动点的速度。因为 $R_{b_1} R_{b_2} = R_{b_1 b_2}$ ，所以有

$$\mathbf{M}(b_1) \mathbf{M}(b_2) = \mathbf{M}(b_1 b_2) \quad (15)$$

也就意味着 \mathbf{M} 的特征值满足

$$\lambda_i(b_1) \lambda_i(b_2) = \lambda_i(b_1 b_2) \quad (16)$$

满足上式函数关系的 λ_i 只能是幂律形式

$$\lambda_i(b) = b^{y_i} \quad (17)$$

其中 y_i 可以理解为，描述系统第 i 个 scaling field 受到重整化操作的影响。比如在 Ising 中，约化温度 t 就是一个相关的 scaling field，那么对应的 y_t 就是描述重整化操作对温度 t 这一参数的影响。

以磁化强度为例计算临界指数

$$\begin{aligned} f(t, h) &= b^{-d} f(t_b, h_b); t_b = t b^{y_t}; h_b = h b^{y_h} \\ m(t, h) &= -\partial f(t, h) / \partial h = -b^{-d} \frac{\partial f(t_b, h_b)}{\partial h_b} \frac{\partial h_b}{\partial h} \\ &= -b^{y_h - d} m(t_b, h_b) \\ \implies \beta &= \frac{y_h - d}{y_t} \end{aligned} \quad (18)$$

最终可以得到磁化强度 m 的临界指数 $\beta = \frac{y_h - d}{y_t}$ 。其中 y_h 和 y_t 都可以从特征分解的过程中计算得到， d 是系统维度。用这种方式，不仅能推导出所有的临界指数

$$\alpha = (2y_t - d)/y_t; \beta = (d - y_h)/y_t; \gamma = (2y_h - d)/y_t$$

还能写出各种临界指数之间的关系，如

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

而这是传统的理论所不能做到的。

3 Appendix

3.1 静态 1d Ising 模型重整化推导

ising 模型的配分函数完整形式如公式19所示，并且我们可以将配分函数进行变换。将 2 个 spin 合为一个大的 spin，这里选择的粗粒化方式是保留奇数位置的 spin

$$\begin{aligned} Z(K_1, N) &= \sum_{\text{odd spins}} \sum_{\text{even spins}} \exp(K_1 \sum_{i=1}^N (s_i s_{i+1})) \\ &= \sum_{\text{odd spins}} \sum_{\text{even spins}} \exp(K_1 [s_1 s_2 + s_2 s_3] \dots \exp[s_{N-1} s_N + s_N s_1]) \\ &= \sum_{\text{odd spins}} 2\cosh(K_1 [s_1 + s_3]) \dots 2\cosh(K_1 [s_{N-1} + s_1]) \end{aligned} \quad (19)$$

其中有个等价关系 $\sum_{s_2 \pm 1} \exp(K_1 s_2 [s_1 + s_3]) = 2\cosh(K_1 [s_1 + s_3])$ 。为了保持系统相互作用的形式一致，可以引入新的系数

$$2\cosh(K_1 [s_1 + s_3]) = \exp(K'_0 + K'_1 s_1 s_3) \quad (20)$$

s_1 和 s_3 取值是 0 或 1，即可以得到两个等式

$$\begin{aligned} 2\cosh 2K_1 &= \exp(K'_0 + K'_1), \text{ for } s_1 = s_3 \\ 2 &= \exp(K'_0 + K'_1), \text{ for } s_1 = -s_3 \end{aligned} \quad (21)$$

根据这两个等式解出 K'_0, K'_1 。即公式8，我们也得到了配分函数 $Z(K)$ 和 $Z(K')$ 之间的关系

$$\begin{aligned} Z(K_1, N) &= \sum_{\text{odd spins}} \exp(K'_0 + K'_1 s_1 s_3) \dots \exp(K'_0 + K'_1 s_{N-1} s_1) \\ &= \exp(N' K'_0 \sum_{\{s_I\}} (K'_1 \sum s_I s_{I_1})) \\ &= \exp(N' K'_0) Z(K'_1, N') \end{aligned} \quad (22)$$

3.2 2d Ising 模型重整化推导

同样的我们还是从配分函数开始。这里选择的缩放尺度 $b = \sqrt{2}$ ，即按照图2.2所示省略掉一半的 spin。

$$\begin{aligned} Z(K_1, N) &= \sum_{\text{remaining spins}} \sum_{\text{decimated spins}} \exp(K_1 \sum_{i=1}^N (s_i s_{i+1})) \\ &= \sum_{\text{remaining spins}} \sum_{\text{decimated spins}} \dots \exp(K_1 s_5 [s_1 + s_2 + s_3 + s_4]) \dots \\ &= \sum_{\text{remaining spins}} 2\cosh(K_1 [s_1 + s_2 + s_3 + s_4]) \dots \end{aligned} \quad (23)$$

同样存在一个等价关系

$$\sum_{s_5 \pm 1} \exp(K_1 s_5 [s_1 + s_2 + s_3 + s_4]) = 2 \cosh(K_1 [s_1 + s_2 + s_3 + s_4]) \quad (24)$$

同样引入相同的系统相互作用形式

$$\begin{aligned} 2 \cosh(K_1 [s_1 + s_2 + s_3 + s_4]) = \\ \exp(K'_0 + \frac{K'_1}{2} [s_1 s_2 + s_1 s_4 + s_2 s_3 + s_3 s_4] + K'_2 [s_1 s_3 + s_2 s_4] + K'_3 s_1 s_2 s_3 s_4) \end{aligned} \quad (25)$$

其中 K'_i 代表的就是 i 阶近邻相互作用，根据 spin 的取值可以得到四个等式关系

$$\begin{aligned} 2 \cosh(4K_1) &= \exp(K'_0 + 2K'_1 + 2K'_2 + K'_3) \\ 2 \cosh(2K_1) &= \exp(K'_0 - K'_3) \\ 2 &= \exp(K'_0 - 2K'_2 + K'_3) \\ 2 &= \exp(K'_0 - 2K'_1 + 2K'_2 + K'_3) \end{aligned} \quad (26)$$

求解四个次系数，也就得到了 2 维的重整化方程⁹